

Reduzierung des Speicherplatzbedarfes von chromatographischen Daten

Einleitung

Durch die Verfügbarkeit der Mikrorechentechnik werden konventionelle Gaschromatographen zu interaktiven Gaschromatographen/Datensystemen ausbaubar. Neben der Steuerung des Gaschromatographen lassen sich eine Vielzahl von Meßwertfassungs- und Meßwertbearbeitungsaufgaben durch den Mikrorechner vornehmen. Bedingung für eine gezielte Meßwertbearbeitung und Archivierung ist das Ablegen der Meßdaten auf einem Massenspeicher. Hierfür sind Floppy-disc-Speicher prädestiniert. Für kleinere Systeme lassen sich auch Kassettenmagnetbandspeicher einsetzen, wobei die anfallende Datenmenge häufig in Widerspruch zum vorhandenen Speicherplatz geraten kann. Zur Reduzierung des Speicherplatzbedarfes bei der Abspeicherung chromatographischer Daten in einem sogenannten „raw data file“ werden aus den genannten Gründen nur die Teile des Chromatogramms abgespeichert, die für das Chromatogramm signifikante Information beinhalten. Das Chromatogramm wird hierzu durch einen Polygonzug approximiert, der dieses innerhalb zugelassener Fehlergrenzen repräsentiert. Abgespeichert werden schließlich nur noch die Punkte des Polygonzuges als Wertepaar Retentionszeit: Meßwert. Zur Darstellung des Chromatogramms auf einem Grafik-Bildschirm bzw. einem anderen grafischen Ausgabegerät wird aus den abgespeicherten Daten das darzustellende Chromatogramm generiert.

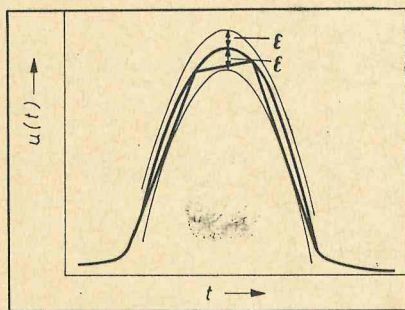


Bild 1. Signalapproximation durch einen Polygonzug

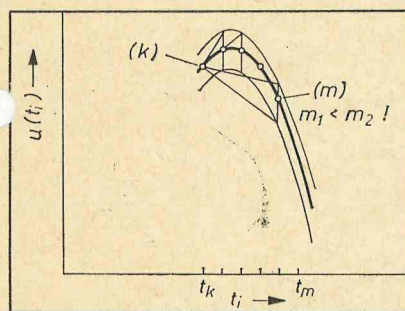


Bild 2. Festlegung der Approximationspunkte

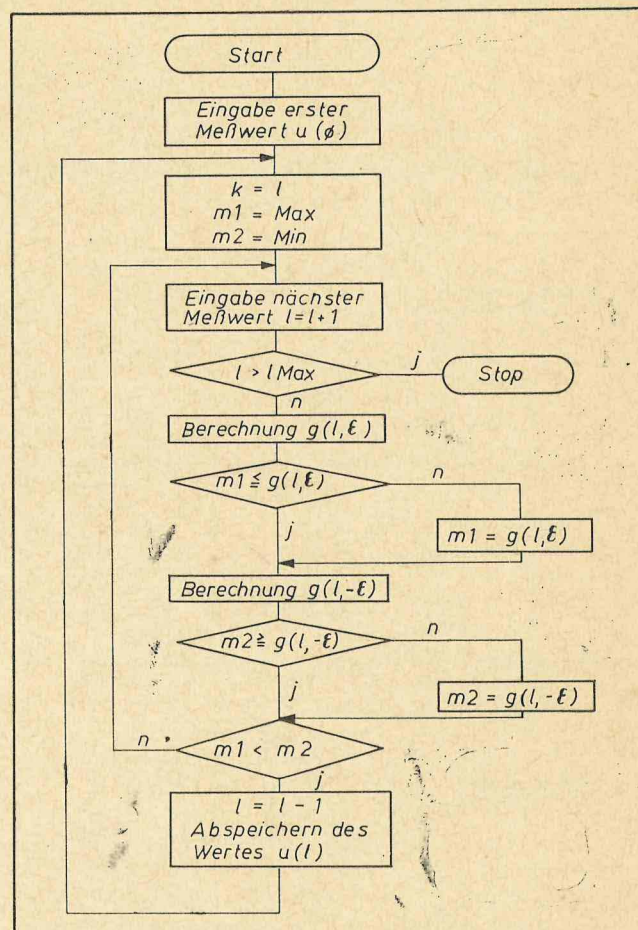


Bild 3. Flußdiagramm

1. Approximationsalgorithmus

Zur Approximation des Chromatogramms wurde eine aus der EKG-Datenverarbeitung bekannt gewordene Polygonapproximation auf ihre Eignung für die dargestellte Problematik untersucht [1]. Bild 1 verdeutlicht den Grundgedanken der Approximation. Das chromatographische Signal wird zu den Abtastzeitpunkten t_i beispielsweise durch eine Spannung $u(t_i)$ repräsentiert. Mit ε wird der zulässige Approximationsfehler bezeichnet. Die Approximation des ursprünglichen Signals erfolgt nun so, daß der Polygonzug innerhalb der zulässigen Fehlergrenzen liegt, wodurch stets

$$|u(t_i) - u^*(t_i)| \leq \varepsilon \quad \text{mit } i = 1, \dots, n \quad (1)$$

gilt. Abzuspeichern sind nun nur noch die Eckpunkte des Polygonzuges, die eine Untermenge der ursprünglichen Daten bilden. Bei der Rekonstruktion eines Chromatogramms aus den reduzierten Daten werden die zwischen den Eckpunkten des Polygonzuges liegenden Punkte über eine Geradengleichung berechnet. Die Bestimmung der abzuspeichernden Daten wird anhand des im Bild 2 dargestellten Ausschnitts von Bild 1 erläutert. Mit dem Meßwert $u(k)$ sei ein Eckpunkt gefunden. Zum nächsten Punkt $u(l)$ werden nun die Anstiege

$$g(l, \varepsilon) = \frac{u(l) + \varepsilon - u(k)}{l - k} \quad (2)$$

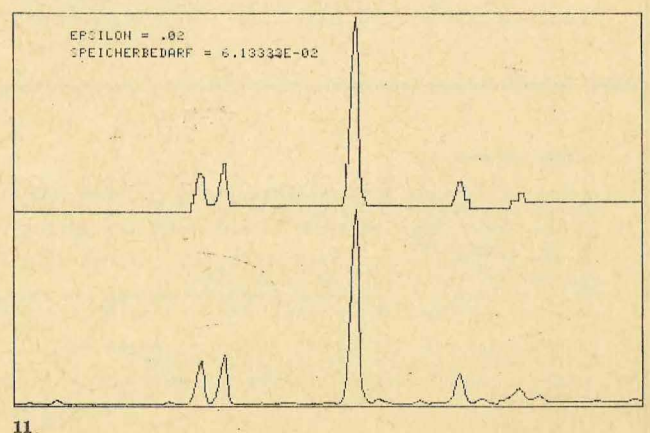
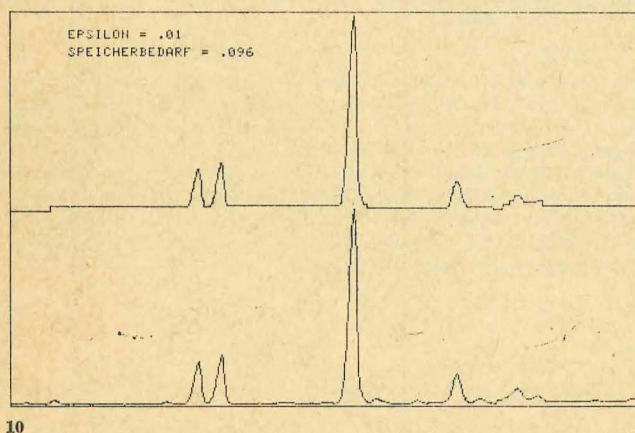
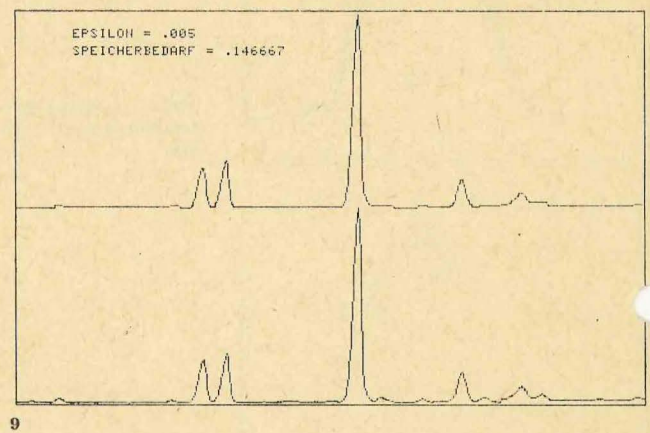
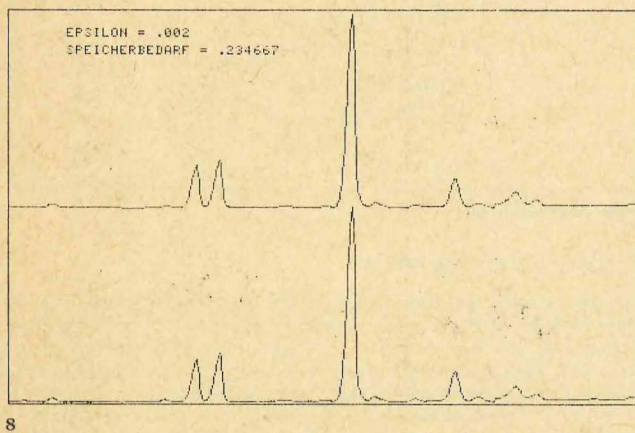
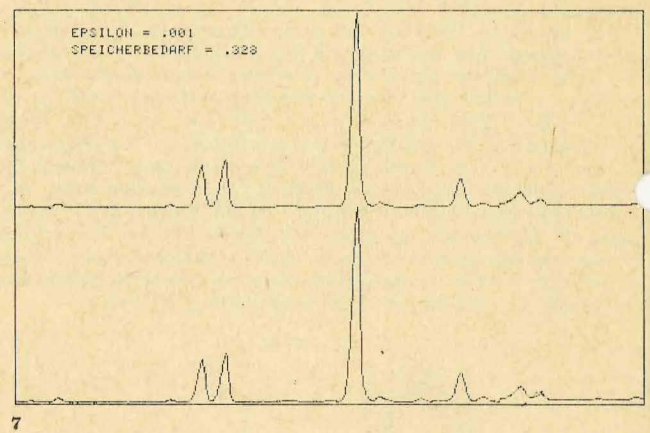
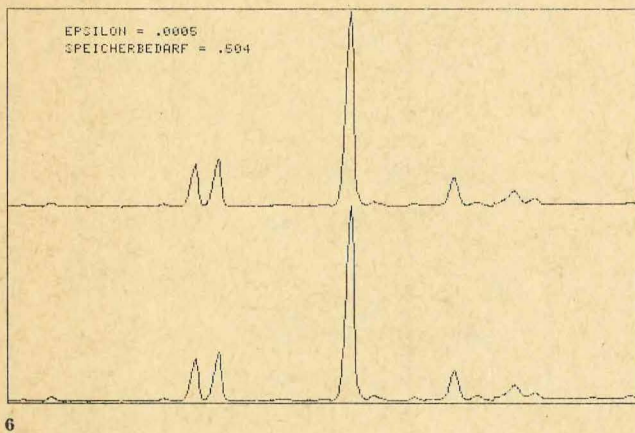
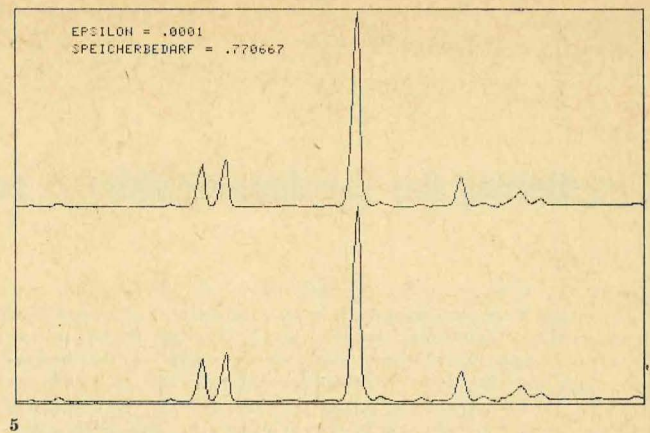
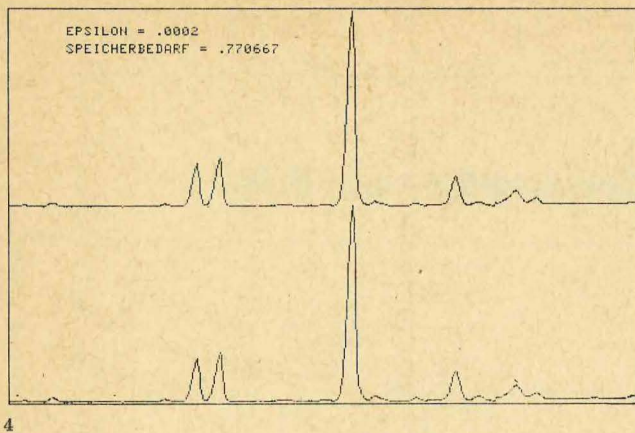
bzw.

$$g(l, -\varepsilon) = \frac{u(l) - \varepsilon - u(k)}{l - k} \quad (3)$$

gebildet und mit den Vorgaben $m1$ und $m2$ verglichen. Ist der Anstieg $g(l, \varepsilon)$ kleiner als der vorgegebene Wert $m1$, wird $m1$

(Fortsetzung von Seite 86)

- [5] Hofmann, W.: Betriebliche Qualitätsüberwachung I; Qualität und Verantwortlichkeit. Lehrbrief. TH Karl-Marx-Stadt 1969.
- [6] Autorenkollektiv: Qualitätskontrolle – Qualitätssicherung. Berlin: Verlag Die Wirtschaft 1964.
- [7] Hofmann, D.; Meinhard, R.; Reineck, H.: Meßwesen, Prüftechnik, Qualitätssicherung. Berlin: VEB Verlag Technik 1980.
- [8] Horath, L.; Nadai, B.: Praktische Qualitätsbestimmung von Lebensmitteln mit Hilfe physikalischer Stoffeigenschaften. ATM (1969) 1, S. 13 bis 16.
- [9] Präzisionskalorimeter. Firmenschrift VEB Junkalor Dessau 1981.
- [10] Infralyt 9 ex. Firmenschrift VEB Junkalor Dessau 1983.
- [11] Signalverarbeitung in Prozeßanalysatoren. Firmenschrift VEB Junkalor Dessau 1983.
- [12] Gichtgasanalyse. Firmenschrift Hartmann & Braun AG Frankfurt/Main (BRD) 1980.
- [13] Breier, J., u. a.: Prozeßidentifikation. Plaste und Kautschuk 27 (1980) 1, S. 35 und 36.



Bilder 4. bis 11. Gegenüberstellung der Chromatogramme aus ursprünglichen (unten) und reduzierten (oben) Daten

durch den Wert $g(l, \varepsilon)$ ersetzt. Ist der Anstieg $g(l, -\varepsilon)$ größer als der Wert m_2 , wird m_2 durch $g(l, -\varepsilon)$ ersetzt. Wie an Bild 2 leicht zu verfolgen ist, wird am Punkt $u(m)$ die Bedingung $m_1 > m_2$ verletzt, weshalb zur Erfüllung von (1) der Punkt $u(m-1)$ als neuer Eckpunkt abzuspeichern ist. Eine zusammenfassende Darstellung des Verfahrens ist mit dem Flußdiagramm im Bild 3 gegeben.

2. Ergebnisse

Die Eignung des Verfahrens wurde anhand realer chromatographischer Daten untersucht. Zu diesem Zweck wurde ein Programm erstellt, das auf einem Datenfile abgelegte chromatographische Daten liest, auf den Maximalwert normiert und auf einem Grafikbildschirm zur Darstellung bringt. Diese ursprünglichen Daten dienen zum Vergleich mit den im zweiten Durchlauf bestimmten reduzierten Daten, die in gleicher Weise dargestellt werden. In den Bildern 4 bis 11 sind die grafischen Darstellungen aus ursprünglichen und reduzierten Daten für verschiedene zulässige Fehler ε gezeigt. Aus den Bildern wird deutlich, daß ohne wesentliche Verschlechterung der Erkennbarkeit bzw. Auswertbarkeit des dargestellten Chromatogramms mit einem Speicherplatzbedarf von etwa 25% zu rechnen ist. Eine weitere Vergrößerung des zulässigen Fehlers bewirkt eine zunehmend schlechtere Darstellung und kann die Auswertbarkeit eines solchen Chromatogramms unmöglich werden lassen. Die Abhängigkeit des Speicherplatzbedarfs für das untersuchte Chromatogramm vom Approximationsfehler ε ist im Bild 12 gezeigt.

zusammenfassung

Vorgestellt wurden Ergebnisse zur Reduzierung des Speicherplatzbedarfes von Chromatogrammen, die mit Hilfe einer Polygonapproximation erreicht wurden. Der erforderliche Speicherplatzbedarf wird durch den zulässigen Approximationsfehler bestimmt, der jedoch gleichzeitig die Darstellungsgüte und die

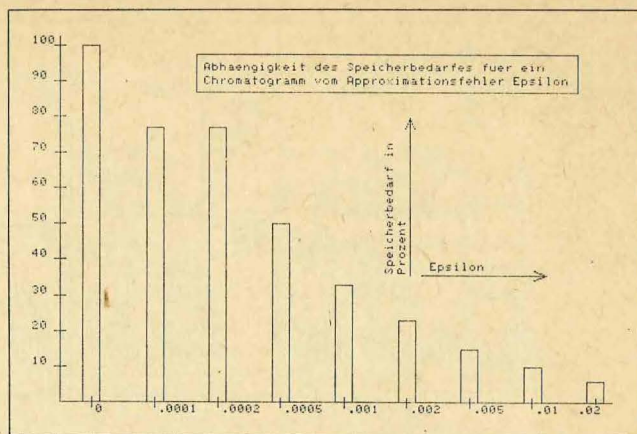


Bild 12. Abhängigkeit des Speicherbedarfs für ein Chromatogramm vom Approximationsfehler ε

Form des Chromatogramms selbst beeinflusst. Chromatogramme mit wenigen Peaks benötigen zwangsläufig beim beschriebenen Verfahren weniger Speicherplatz als Chromatogramme, die viele Peaks enthalten. Die effektive Speicherplatzeinsparung wird deshalb für verschiedene Anwendungsfälle unterschiedlich sein.

Literatur

- [1] Ishijima, M.; Shin, S.-B.; Hostetter, G. H.; Sklansky, J.: Scan-Along Polygonal Approximation for Data Compression of Electrocardiograms. IEEE Trans. BME-30 (1983) 11, pp. 723–729.

msr 8183 Dr.-Ing. C. Kühnel, Zentralinstitut des Sportmedizinischen Dienstes Kreisch

Elektronisches Thermometer

0. Einleitung

Neben den klassischen Temperatursensoren, wie Widerstandsthermometer, Thermoelemente und Quecksilberthermometer, werden zunehmend auch Halbleiterfühler eingesetzt. Im Bereich von -50 bis $+150$ °C können Silizium-Dioden mit Erfolg angewendet werden [1]. Im folgenden wird eine Temperaturmeßeinrichtung vorgestellt, die mit geringem Aufwand gute Ergebnisse bringt und sich auf einfache Weise als BMSR-Gerät einsetzen läßt.

1. Funktionsbeschreibung

Das elektronische Thermometer besteht aus den Baugruppen Temperatursensor, Konstantstromquelle für Sensor, Referenzspannungserzeugung, Differenzverstärker und Leistungsstromquelle für den Ausgangsstrom (Bild 1).

Zur Signalgewinnung wird folgender Effekt ausgenutzt: Wird ein pn-Übergang in Flußrichtung von einem konstanten Strom durchflossen, so ist die Flußspannung linear von der Temperatur abhängig [2]. Als pn-Übergang wird eine Doppeldiode SAL 41 verwendet. Damit keine Eigenerwärmung der Dioden auftritt, wird ein Strom von 0,1 mA gewählt. Die erreichbare Spannungsänderung über den Dioden beträgt etwa 4 mV/K. Die Konstantstromquelle besteht aus VT 1, VD 2, 3 und R 5, 6 (Bild 2). VD 3 dient zur Kompensation des Temperaturkoeffizienten der Basis-Emitter-Spannung von VT 1 [3]. Mit der Referenzspannung wird die Flußspannung der Fühlerdioden kompensiert. Sie beträgt etwa 1,5 V und wird durch Spannungsteilung von VD 1 gewonnen. Mit R 7 läßt sich die Referenzspannung und damit der Nullpunkt genau einstellen. Der Operationsverstärker A 1 bildet die Differenz von Referenzspannung und Flußspannung der Fühlerdioden und verstärkt sie um den Faktor 2,2. Der Verstärker A 2 wandelt die Differenzspannung in einen eingepreßten Gleichstrom um. Mit R 14 kann die Verstärkung und damit der Meßbereichsendwert eingestellt werden.

Die eingesetzten Kondensatoren mindern die Schwingungsneigung der Operationsverstärker.

2. Konstruktive Lösung

Der Temperaturfühler (Doppeldiode) befindet sich an der Spitze des Meßeinsatzrohres und ist über zwei isolierte Drähte mit dem Meßumformer verbunden. Die Elektronik des Meßumformers befindet sich auf einer runden Leiterplatte von 52 mm Durchmesser. Die Leiterplatte ist in einem Anschlußkopf, Form B, aus Plast nach TGL 9248 (VEB Thermometerwerk Geraberg) befestigt. Bild 3 zeigt das komplette Thermometer mit geöffnetem Deckel.

Der elektrische Anschluß erfolgt an 4 Klemmen, die sich mit auf der Leiterplatte befinden. Für die Spannungszuführung und für die Weiterleitung des Ausgangssignals genügen Kupferleitungen von 0,5 mm Durchmesser. Die Stromversorgung übernimmt ein EMU-Netzgerät vom Typ SVG 5581.

3. Abgleich

Der Abgleich des Thermometers ist relativ aufwendig. Durch die großen Toleranzen der Flußspannungen und des Temperaturkoeffizienten der Fühlerdioden ist ein Abgleich „über alles“ bei der Thermometerherstellung erforderlich. Dazu werden zwei thermostatisierte Wasserbäder mit unterschiedlichen Temperaturen (z. B. 30 °C und 90 °C) benötigt. Durch wechselseitigen

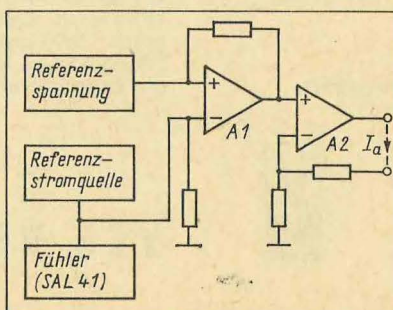


Bild 1. Prinzipschaltbild